拡散律速結合反応の統計場理論

福井大・工　　大月　俊也

1. 統計場理論とは何か

最初に表題にある統計場理論について説明する。「量子場」あるいは「量子場の理論」という言葉はよく知られているが、「統計場」または「統計場の理論」という言葉は初めて聞くという人も多いのではないかと思われる。しかし、両者は以下に述べるように実際には兄弟、または姉妹の関係にあると考えられる。

物理学は古典力学から出発したが、ここでは自由度が有限の場合には系の運動はニュートン方程式、つまり常微分方程式によって記述される。この段階を仮にレベルIと表わす。次に自由度が無限大になると系は一般に偏微分方程式で記述される。代表例としては電磁気学におけるマックスウェル方程式、流体力学におけるナビエ・ストークス方程式などが挙げられる。「場」の概念もここで導入される。一方、量子的ゆらぎが存在する場合、すなわち量子系においては自由度が有限の場合でも系は偏微分方程式、シュレーディンガー方程式に従う。同様に、(いわゆるランダム力などの)統計的なゆらぎが存在する場合も系はフォッカー・プランク方程式に代表される偏微分方程式によって記述される。このように偏微分方程式によって表わされる段階をレベルIIとする。

最後に3つの要素、「無限自由度」、「量子ゆらぎ」、「統計ゆらぎ」のうち2つが共存する場合について考える。この段階、レベルIIIでは系は一般に汎関数方程式によって記述され、問題を解くためには何らかの形で汎関数積分を行なわなければならない。これがいわゆる「場の理論」で、物理学では無限自由度の量子系を取り扱う「量子場の理論」として最初に定式化された。そして統計ゆらぎを伴った無限自由度系を議論するため「統計場の理論」が必然的に導入されることになる。自然界には臨界現象や乱流など統計ゆらぎが本質的な役割を果たしている無限自由度系が数多く存在する。演算子を用いた表式、経路積分による定式化、汎関数微分方程式としての記述など問題に応じて等価な表現はいくつかあるが、これらの現象を研究するためには広い意味での統計場理論がどうしても必要となる。ここではこの統計場理論の反応拡散系への応用例について報告する。図1に上に述べたことを模式的に示す。また、著者の目についた参考書[1-3]を文末に掲げる。

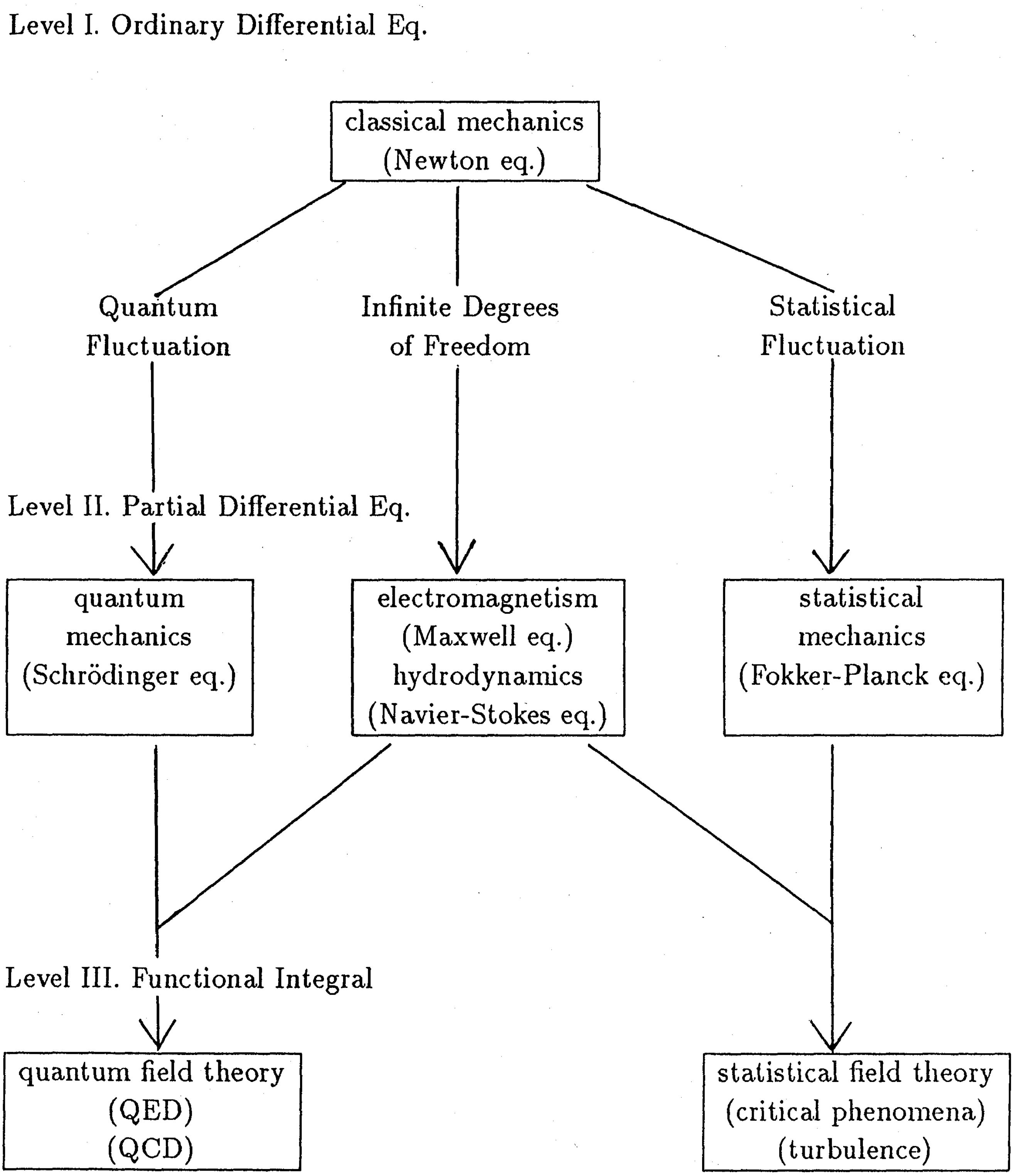

図 1. 量子場理論と統計場理論

2. 拡散律速結合反応

反応拡散系の取り扱いも1節で述べた3つの段階に整理できる。レベルIに相当するのは通常の反応速度式による解析で、系はいくつかの粒子濃度の従う常微分方程式で記述される。 これは系が空間的に一様と見なせる場合、反応拡散系の言葉で言えば反応律速過程において成立する。 反応が拡散律速の場合、系は一般的に不均一となり粒子濃度は時間だけでなく場所の関数となる。 従って、ここでの基礎方程式は偏微分方程式である反応拡散方程式となる。 一方、空間的に一様でも統計ゆらぎの存在下では粒子濃度はフォッカー・プランク方程式などの偏微分方程式に従う。 これらがレベルIIに対応する。 そしてレベルIIIとして、統計ゆらぎが重要な役割を果たしている拡散律速過程に対しては統計場理論に基づいた議論をしなければならない。 以上の事柄を模式的に図2に示す。

統計場理論を必要とする具体的な対象としてはシュレーゲルモデル等で見られる非平衡臨界現象などがあるが、ここでは近年注目を集めている簡単な反応系における遅い緩和(long-time tail)[4,5]について調べる。具体的には2分子結合反応 $\mathrm{A}+\mathrm{A}\to\emptyset$ で $d<d_c=2$ において観測される粒子濃度$\rho(t)$ の非解析的挙動[6,7]

$$\rho(t)\propto t^{-d/2}\qquad (t\to\infty)\tag{2.1}$$

を取り扱う。

3. 方法および結果

統計場の構成方法は主に2つある。 1つは臨界現象などの研究でよく使われるMartin-Siggia-Roseの方法[8,9]と呼ばれるもので、偏微分方程式にランダム力を加えた確率偏微分方程式を出発点とする。 もう1つはFock空間の方法[10,11]で、基礎方程式を生成消滅演算子を用いて表現することから始める。 ここでは粒子の生成消滅を伴う反応系などの記述に便利な後者の方法を適用する。

従来、統計場理論の応用は平衡系あるいは非平衡系であっても時間的な定常状態にある系に限られていたが、ここで取り扱う結合反応系では定常状態は単に$\rho(\infty)=0$で与えられる。 言い換えると、問題となるのは定常状態自体ではなく定常状態への緩和過程である。 そこで、初期条件を明確に考慮した定式化を行い、非定常な時間発展を直接議論した。

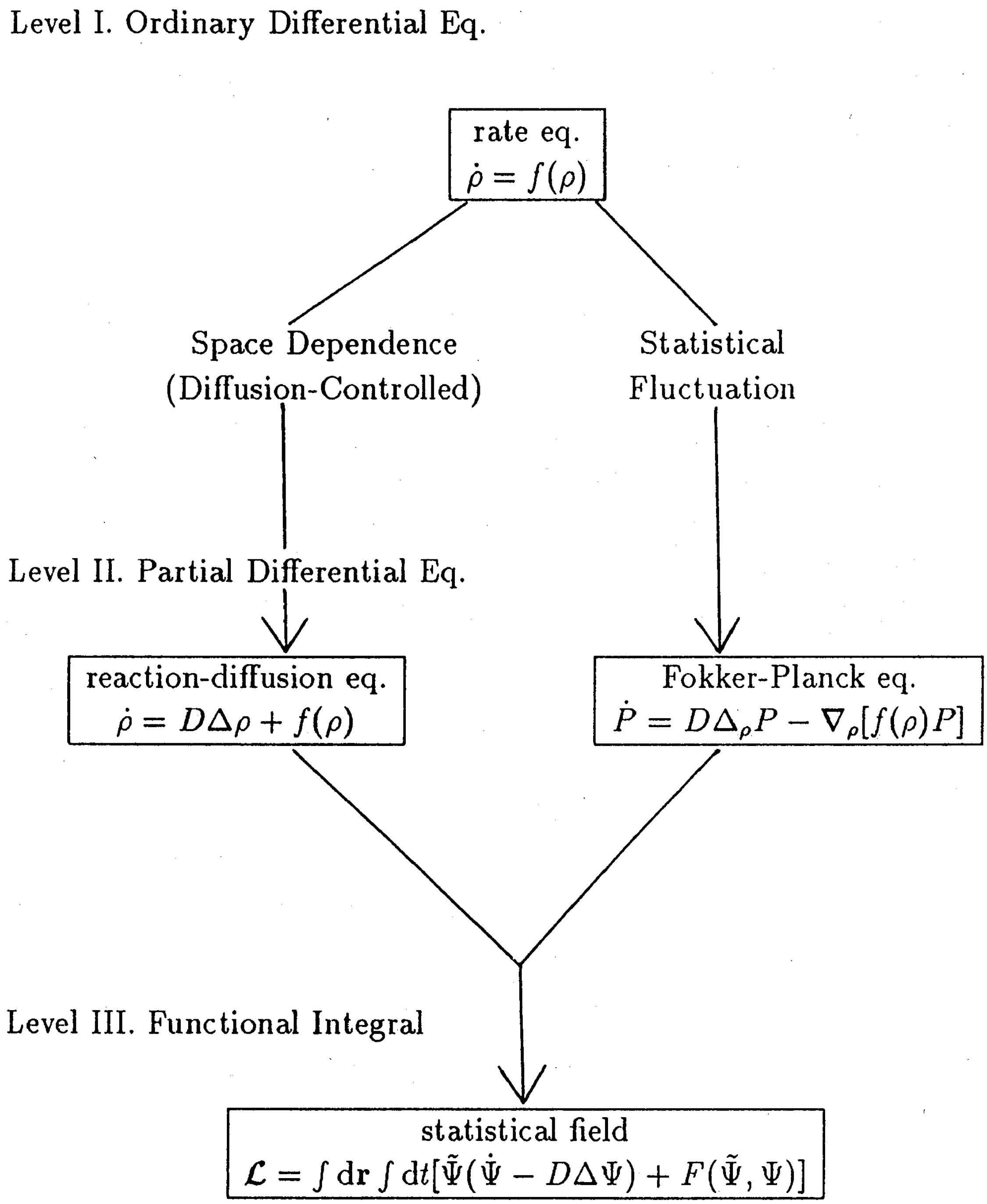

図 2. 反応拡散系の統計場理論

結果の詳細は文献[12]に譲り、ここでは概要を報告するにとどめる。まず通常の処方に従って繰り込みの操作を実行しなければならないが、この問題では特定のダイアグラムのみが寄与するため繰り込みは厳密に行える。（このことは最初にPeliti[13]により指摘されたが、上に述べた初期条件を無視したためその後の議論は不明確で、具体的な計算も不可能である。）これより各種のグリーン（相関）関数に対する厳密なスケーリング関係式が導かれる。例えば、粒子濃度$\rho(t)$は次のような関係を満足する。

$$\rho(t) = \rho_0 F(\rho_0 k (Dt)^{d/2}). \tag{3.1}$$

ここでρ_0は粒子濃度の初期値、kは反応速度、Dは拡散係数を示す。(2.1)式も$t \to \infty$の極限で$\rho(t)$がρ_0に依らないという条件と(3.1)式より導かれる。スケーリング関数Fの具体形も求められる。ただし、この場合は厳密な計算は困難で、摂動論に頼らざるを得ない。例えば、$X = \rho_0 k (Dt)^{d/2}$の1次のオーダーまでで$f(X)$は次のように表される。

$$F(X) = 1 - \frac{1}{\Gamma(2-d/2)\Gamma(1+d/2)}(8\pi)^{d/2-1} X + \mathcal{O}(X^2). \tag{3.2}$$

参考文献

1. D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1984).
2. C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1989).
3. J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon, Oxford, 1989).
4. R. Kopelman, Science **241** (1988) 1620.
5. V. Kuzovkov and E. Kotomin, Rep. Prog. Phys. **51** (1988) 1479.
6. A. A. Ovchinnikov and Y. B. Zeldovich, Chem. Phys. **28** (1978) 215.

7. D. Toussaint and F. Wilczek, J. Chem. Phys. **78** (1983) 2642.

8. P. C. Martin, E. D. Siggia and H. A. Rose, Phys. Rev. **A8** (1973) 423.

9. H. K. Janssen, in *Dynamical Critical Phenomena and Related Topics*, ed. C. P. Enz (Springer, Berlin, 1979).

10. M. Doi, J. Phys. **A9** (1976) 1465.

11. P. Grassberger and M. Scheunert, Fortschr. Phys. **28** (1980) 547.

12. T. Ohtsuki, Phys. Rev. **A** (in press).

13. L. Peliti, J. Phys. **A19** (1986) L365.